

Анализ форм сечений жидких цилиндрических включений, мигрирующих в неоднородно нагретом кристалле в стационарных тепловых условиях

Проценко Влада Вячеславовна
Южный федеральный университет
Гармашов Сергей Иванович, к.ф.-м.н.
vlada.protsenko@gmail.com

Включения жидкой фазы в кристалле могут перемещаться в нем под воздействием градиента температуры. Это явление кратко называют процессом термомиграции. Оно используется как способ формирования легированных областей в объеме полупроводникового материала и создания на их основе разнообразных полупроводниковых приборов. Кроме того, термомиграция может использоваться для изучения процессов кристаллизации, растворения и диффузии, поскольку именно эти процессы обуславливают движение жидких включений в неоднородно нагретом кристалле: на более нагретой межфазной границе происходит растворение вещества кристалла, атомы которого диффундируют в жидкой фазе и затем осаждаются на менее нагретой границе включения.

Форма мигрирующего включения определяется анизотропией удельной межфазной энергии и межфазной кинетикой (т.е. механизмом процессов кристаллизации и растворения). Если бы не было влияния межфазной кинетики, то форма мигрирующего цилиндрического включения с любой площадью его поперечного сечения совпадала бы с равновесной формой, по которой можно было судить об анизотропии удельной межфазной энергии. Однако, в общем случае, включение ограничено не только атомно-шероховатыми, но и сингулярными (атомно-гладкими) участками, процессы кристаллизации (растворения) на которых, как правило, затруднены, что приводит к отклонению формы мигрирующего включения от равновесной формы [1, 2] и тем самым осложняет определение анизотропии межфазной энергии.

Цель настоящей работы - предложить методику определения анизотропии межфазной энергии по неравновесным формам сечений мигрирующих включений из анализа расчетов, проведенных на основе компьютерной программы [3]. В качестве модельной системы рассматривается жидкое цилиндрическое включение в кристалле, ограниченное двумя сингулярными (плоскими) и двумя несингулярными (криволинейными) участками (рис. 1а). Предполагается, что анизотропия удельной межфазной энергии описывается функцией

$$\gamma(\varphi) = \gamma_{\min} + (\gamma_{\max} - \gamma_{\min}) |\sin(\varphi)|,$$

где γ_{\min} , γ_{\max} – минимальное и максимальное значения удельной межфазной энергии; φ – угол, определяющий ориентацию соответствующей кристаллографической плоскости.

Степень анизотропии межфазной энергии $\eta = \gamma_{\max} / \gamma_{\min}$ можно определить из равновесной формы включения (рис. 1а) по отношению ширины равновесного включения w_0 к его толщине l_0 : $\eta = \gamma_{\max} / \gamma_{\min} = w_0 / l_0$.

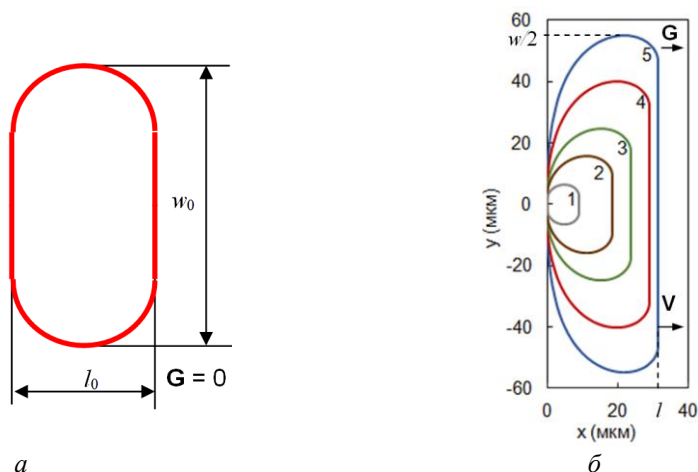


рис. 1. Формы сечений цилиндрических включений в равновесии (а) и при миграции со скоростью V под действием градиента температуры G в случае $S = 100$ (1), 500 (2), 1000 (3), 2000 (4), 3000 (5) кв. мкм (б)

Из проведенных расчетов форм сечений мигрирующих включений следует, что с увеличением площади сечения включения (S) отношение ширины сечения включения к толщине w/l возрастает (рис. 1б, рис. 2) и отличается от того значения, которое будет в равновесии, то есть от η . Причина этого возрастания – межфазные ограничения для процессов кристаллизации (растворения) на сингулярных участках границы.

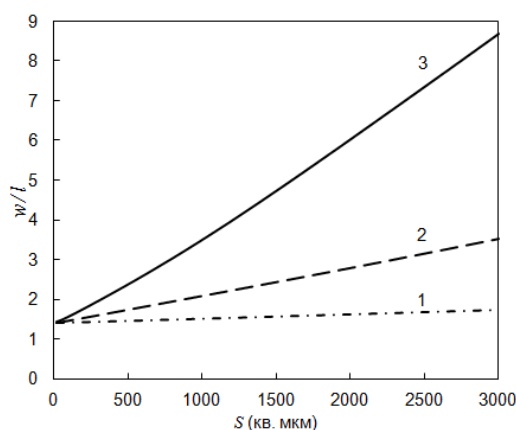


рис. 2. Рассчитанные зависимости отношения w/l для включений с разной площадью их сечений S , мигрировавших в одинаковых тепловых условиях при разной степени затрудненности межфазных процессов (степень затрудненности межфазных процессов возрастает с номером кривой; $\eta = \gamma_{\max}/\gamma_{\min} = 1.4$)

Однако, как видно из рис. 2, если иметь информацию об отношении w/l для включений с разной площадью их сечений S , мигрировавших в одинаковых тепловых условиях, то путем экстраполяции аппроксимирующей зависимости $w/l = f(S)$ к $S=0$, можно оценить истинное значение анизотропии межфазной энергии. В докладе рассматривается вопрос о выборе площадей сечений включений, по формам которых можно определить анизотропию межфазной энергии с необходимой точностью.

Список публикаций:

- [1] Cline H.E., Anthony T.R. // *J. Appl. Phys.* 1977. V. 48. P. 5096.
- [2] Garmashov S.I., Gershanov V.Y. // *J. Cryst. Gr.* 2009. V. 311. P. 413.
- [3] Garmashov S.I., Prikhodko Y.V. // *Abstracts of Lecturers and Young Scientists of Fourth China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications (CRC-NAA'15)*, 26-29 June 2015, Rostov-on-Don. 2015. P. 99.

Влияние интеркаляции хрома на структуру и кинетические свойства системы Cr_xVSe_2 ($x \geq 0.25$)

Радостев Илья Николаевич

Селезнева Надежда Владимировна, Топорова Наталья Максимовна, Шерокалова Елизавета Маратовна

Уральский федеральный университет

Селезнева Надежда Владимировна, к.ф.-м.н.

radostev.ilya4955148@gmail.com

Из литературных данных известно, что в диселениде ванадия (VSe_2) на температурной зависимости электросопротивления при $T_1 \sim 110$ К наблюдается аномалия. Аналогичная аномалия наблюдается и в изоструктурном диселениде титана (TiSe_2) при $T_1 \sim 150$ К. Такое поведение вызвано формированием состояния с волной зарядовой плотности (ВЗП) при $T < T_1$ [1, 2]. Интеркаляции хрома $x \leq 0.02$ в Cr_xTiSe_2 приводит к подавлению перехода. На основании детальных структурных исследований, данных магнитных измерений и теплового расширения для системы Cr_xTiSe_2 сделан вывод о возможном возвращении ВЗП при большой концентрации внедренных атомов хрома $x \geq 0.25$ [1].

Данная работа посвящена изучению влияния интеркаляции хрома в Cr_xVSe_2 ($x = 0, 0.25, 0.33, 0.5, 0.6$) на структуру и кинетические свойства.

Синтез системы Cr_xVSe_2 ($x = 0, 0.2, 0.25, 0.33, 0.5, 0.6$) производился методом твердофазных реакций по двухступенчатой технологии при температуре 580°C с последующим медленным охлаждением. Для проведения рентгенофазового анализа и уточнения параметров элементарных ячеек использовался метод рентгеновской дифракции на порошковых материалах. Измерения электрического сопротивления проводились стандартным четырехзондовым методом на образцах правильной геометрической формы.

Соединения Cr_xVSe_2 $0.25 \leq x \leq 0.6$ индицируются в моноклинной сингонии с пространственной группой $I 2/m$. Атомы хрома упорядочиваются в цепочки с образованием сверхструктуры $\sqrt{3}a_0 \times a_0 \times 2c_0$. В исходном соединении-матрице VSe_2 , синтезированном при $T = 580^\circ\text{C}$, наблюдается металлическое поведение сопротивления и обнаружена аномалия в области $T_1 = 110$ К, что согласуется с литературными источниками. На температурных зависимостях сопротивления Cr_xVSe_2 при концентрациях хрома $x = 0, 0.25, 0.33, 0.5, 0.6$